

Félvezető-technológia számítógépes szimulációja

E10 621.3.049.77.001.57

1. Bevezetés

A korszerű integrált áramkörök napjainkban — kis számú kivételtől eltekintve — szilíciumból készülnek. Az áramkörök tervezésének két fő fázisa van:

1. a felületi struktúra megtervezése (logikai vázlat¹ részáramkörök, layout, maszkok),
2. a mélységi (felületre merőleges) struktúra megtervezése.

Az 1970-es évek elején, amikor SSI/MSI bonyolultságú áramkörök játszották a döntő szerepet, ezek a fázisok élesen elválaszthatók voltak. Az 1 alatt megjelölt tervezési fázis esetleg még további, egymástól független tervezési fázisokra volt bontható, élesen elkülöníthető volt az 1. fázison belül a logikai tervező, áramköri tervező és a layout tervező feladata. Ettől pedig elválasztható volt a 2. fázis tervezését végző félvezető-technológus feladatköre. Napjainkban a helyzet gyökeresen megváltozott. Két alapvető ok játszott ebben szerepet:

1. Új, nagyobb integráltsági szintű elemek jelentek meg (CCD, I²L), amelyek már nem bonthatók fel különálló áramköri elemekre, egymagukban képesek ellátni egy-egy — néha nem is túlságosan egyszerű — logikai funkciót.

2. Az LSI/VLSI áramkörök megvalósításakor a nagy funkcióúsűrűséget nem annyira a chip felületének növelésével, hanem inkább a csíkszélesség csökkentésével gazdaságos elérni (ez egyébként a működési sebesség, disszipáció stb. szempontjából is előnyös), így a kisebb csíkszélességek mellett a felületi struktúra és a mélységi struktúra káros kölcsönhatásainak (pl. aládiffundálás) jelentősége nagymértékben megnövekedett. Ez viszont azt jelenti, hogy jól működő áramkör csak úgy valósítható meg, ha a tervezés 1. és 2. fázisa maximálisan összehangoltan, a tervezők folyamatos együttműködésével történik.

A következőkben a BME Elektronikus Eszközök Tanszékén az MTA Központi Fizikai Kutató Intézetével együttműködésben kifejlesztés alatt álló STEP (Silicon Technology Evaluation Program) technológiai szimulációt végző programrendszert ismertetjük.

Beérkezett: 1979. X. 12.

* Aspirális, Tallinni Műszaki Egyetem
** Nappali szakmérnökhallgató (KFKI)

¹ Itt elsősorban a digitális funkciót ellátó áramkörökre gondolunk, az analóg áramköröknél ugyanis
a) a fő típusok napjainkban többé-kevésbé kialakultak,
b) bonyolultsági fokuk ritkán haladja meg az SSI, esetleg MSI szintet,
c) az áramkörtechnika alapvető trendjének tűnik az, hogy minél több funkciót digitális módszerekkel oldjon meg.

2. Bemeneti és kimeneti adatok

A programrendszer bemeneti adatait a szilícium integrált áramköri technológia fő lépései és ezek paraméterei képezik:

1. predepozíció,
2. behajtás,
3. epitaxiális rétegnövesztés,
4. oxidáció,
5. ionimplantáció,
6. maratás,
7. oxid/nitrid depozíció,
8. fémezés/polyszilícium-felvitel.

Az 1–4 lépések olyan hőmérsékleten folynak le, ahol az adalékanyagok diffúziója következtében azok eloszlása megváltozik. Az 5–8 lépések rendszerint olyan alacsony hőmérsékleteket igényelnek, amelyen a szilíciumban már jelenlevő adalékok eloszlása változatlan marad.

A felhasználó — orientált bemeneti nyelv messzemenően követi a Stanford University Integrated Circuit Laboratory által 1978 júniusában publikált SUPREM—II. program bemeneti nyelvét [1].

Az egyes technológiai lépések szimulációja után rendelkezésre áll valamennyi adalék eloszlása, melyből a program posztprocesszor szegmense a felhasználó igényeinek megfelelően megadja:

- a) grafikus formában az egyes adalékok, ill. az elektromosan aktív eredő adalékkoncentráció eloszlását,
- b) a mélységi geometriai jellemzőket (oxid/nitrid-vastagságok, az egyes átmenetek mélysége),
- c) az egyes félvezető rétegek elektronikus jellemzőit (négyzetes ellenállás, transzportfaktor, átiszűrődási feszültség),
- d) az egyes átmenetek elektronikus jellemzőit (kisszintű $I-U$ karakterisztika, emitterhatásfok, tértöltéskapacitás, letörési feszültség),
- e) a MIS struktúrajellemzőket (oxid/nitrid-kapacitások, MOS-kapacitás, küszöbfeszültség).

3. Diffúzió modellezése és algoritmusai

Az adalékoknak az anyagon belüli viselkedését az egyes adalékokra külön-külön felírt

$$\frac{d}{dt} \int_{(V)} C_i dV = \int_{(V)} G_i dV - \oint_{(S)} J_i dS \quad (1)$$

folytonossági egyenletek, valamint a J adaléktranszportot leíró

$$J_i = -\text{grad}(D_i C_i) \quad (2)$$

transzportegyenletek (1. Fick-törvény) írják le, ahol

- C_i az i -edik adalék koncentrációja,
- G_i az egységnyi térfogatban időegység alatt generálódó elektromosan aktív i -edik adalék-atomok mennyisége (pl. intersticiális \rightarrow substitucionális átmenetek),
- J_i az i -edik adalék fluxusa,
- D_i az i -edik adalék diffúziós állandója.

Az egyes adalékok közötti kölcsönhatást azzal vesszük figyelembe, hogy az adalékok mozgását a diffúzió elméletének megfelelően neutrális, pozitív, továbbá egyszeresen és kétszeresen negatív töltésű vakanciák betöltése útján vesszük számításba, vagyis a diffúziós állandó

$$D = D^{\circ} + D^{+}V^{+} + D^{-}V^{-} + D^{=}V^{=}, \quad (3)$$

ahol a vakanciák relatív (intrinsic elektronkoncentrációra vonatkoztatott) sűrűsége:

$$V^{+} = \frac{n_i}{n}, \quad V^{-} = \frac{n}{n_i}, \quad V^{=} = \left(\frac{n}{n_i}\right)^2. \quad (4)$$

Itt n értékét minden egyes pontban az elektromosan aktív eredő adalékkoncentráció szabja meg. Ez az elméletileg megalapozott módszer az egyszerű fenomenológikus elmélethez képest — a gyakorlati eredményekkel összhangban levő — nagyságrendi eltéréseket ad.

A diffúziós folyamatok modellezésekor az (1) folytonossági egyenletben J_i kizárólag a (2) egyenlet szerinti adalékfluxust jelentette, G_i pedig néhány kivételtől eltekintve elhanyagolható.

Kisebbségi algoritmusproblémákat okozott a Si-SiO₂ határfelületen

- a két közeg eltérő diffúziós állandója, valamint
- a határfelületen fellépő

$$J_s = h \left(C_{ox} - \frac{C_{Si}}{S_{12}} \right) \quad (5)$$

fluxus, ahol

- h a felületi transzporttényező,
- S_{12} az egyensúlyi szegregáció-állandó,
- C_{ox}, C_{Si} a határfelület két oldalán levő adalék-koncentráció.

A gyakorlatban is megfigyelt erős foszforadalékolás esetén tapasztalható diffúziós anomáliákat a Fair és Tsai által proponált [2] modellel vesszük számításba. Száraz és nedves oxigén jelenlétében a diffúziós állandó megváltozását — megalapozott elméleti modell hiányában — empirikus korrekcióval módosítjuk.

A diffúziós modell részleteivel kapcsolatosan egy korábbi közleményünkre utalunk [3].

4. Oxidáció modellezése és algoritmus

A diffúziós folyamatok algoritmusaival összehasonlítva lényegesen bonyolultabb azonban a szilícium — szilíciumdioxid határfelület oxidáció következtében létrejövő eltolódása által okozott algoritmus-probléma. A határfelület eltolódása következtében létrejövő adalékáramlás az egyes adalékokra külön-külön leírható egy

$$J_i = -v_{ox}(C_{ox} - \alpha C_{Si}) \quad (6)$$

adalékfluxussal. Ez az összefüggés egyszerűen azt fejezi ki, hogy az oxidréteg vastagságának v_{ox} sebességű növekedésekor az oxidálódó szilíciummal együtt mennyi adalékatom kerül át az oxidba. Az α faktor, amelynek számértéke 0,44, azért szerepel, mert 0,44 egységnyi térfogatú szilíciumból keletkezik egységnyi térfogatú szilíciumdioxid.

Az oxidréteg növekedésének sebességére az [1] által javasolt

$$z_{ox}^2 + Az_{ox} = B(t + \tau) \quad (7)$$

formula inkrementális alakját alkalmazzuk:

$$z_{ox} = \frac{1}{2} \left[-(2z_{ox} + A) + \sqrt{(2z_{ox} + A)^2 + 4BA} \right]. \quad (8)$$

Ezen összefüggésekben az A és B tényezők arányosak az oxigén parciális nyomásával, a hőmérséklettől pedig az Arrhenius-törvénynek megfelelően, lényegében exponenciálisan függenek.

A modell vizsgálata arra az eredményre vezetett, hogy a diffúziós folyamatra kedvezőnek talált négyzetesen növekvő időlépés a megoldás konvergenciája szempontjából itt is jól alkalmazható.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetüket fejezik ki Gyulai Józsefnek, a fizikai tudományok doktorának, a diffúzióval és ioninimplantációval kapcsolatos diszkussziókban nyújtott értékes közreműködéséért.

IRODALOM

- [1] Antoniadis, D. A.—Hansen, S. E.—Dutton, R. W.: SUPREM—II. Program for IC Process Modeling and Simulation. Technical Report No. 5019—2, Stanford Electronics Laboratories, June, 1978.
- [2] Fair, R. B.—Tsai, J. C. C.: Quantitative Modell for the Diffusion of Phosphorous in Silicon and the Emitter Dip Effect. Journ. El. Chem. Soc. 124, 1977. pp. 1107—1118.
- [3] Tarnay, K.—Masszt, F.—Mizsei, J.—Baji, P.—Rang, T.—Drozdý, Gy.—Kovács, B.: Silicon Planar Technology Process Modeling. Proceedings of the Third International Spring Seminar on Electronics Technology, 1979. pp. 110—120.
(Magyar nyelven: Finommechanika-Mikrotechnikában, 18, 1979. pp. 257—260.)